

## **Sokatomos rendszerek** (vázlat a tankönyv fejezetei alapján)

### 3.2. Gázok

#### 3.2.1. Ideális gáz

Az ideális gáz modelljét úgy képzelhetjük el, hogy egy edényben a nagyszámú ( $N$ ) gömbalakú részecske rendszertelen mozgást végez, miközben egymással és az edény falával rugalmasan ütköznek. Minden egyéb **kölcsönhatás**, valamint a **részecskék összterfoglata** az edény térfogatához képest **elhanyagolhatóan kicsi**.

A modellben a gáz nyomása a részecskéknek az edény falával való ütközései során kifejtett erőlködésekből származik, a gáz hőmérséklete pedig a részecskék átlagos mozgási energiájával arányos.

A gáz állapotát jellemző paraméterek között az állapotegyenlet teremt összefüggést:  $pV = NkT$ , ahol  $N$ ,  $V$ ,  $p$ ,  $T$  az állapotot leíró termodinamikai paraméterek: részecskeszám, térfogat, nyomás és hőmérséklet;  $k$  a Boltzmann-állandó.

#### 3.2.3. Reális gáz

A gázok viselkedésének reálisabb leírás érdekében két fontos tényezőt jó, ha figyelembe veszünk. Egyrészt a részecskéknek van saját térfogatuk, másrészt a reális gáz az ideális gáznál valamivel kisebb nyomást fejt ki a falakra, mert amikor egy molekula a falhoz, vagyis a molekulahalmaz széléhez közeledik, a többiek vonzása kissé lefékezi. Ezeket a korrekciókat veszi figyelembe a van der Waals-féle állapotegyenlet:

$(p + aN^2/V^2)(V - Nb) = NkT$ , ahol  $a$  az anyagi minőségtől függő állandó, amely az intermolekuláris erők nagyságára jellemző,  $b$  pedig egyetlen molekula saját térfoglata.

### 3.1. Boltzmann-eloszlás

#### 3.1.1. A részecskék állapotainak eloszlása

Energetikai szempontból egy rendszer állapotát legrészletesebben azzal jellemezhetnénk, ha külön-külön megadjuk minden egyes részecske ( $N$  darab) pillanatnyi energiáját. Mivel ilyen sok adattal amúgy sem tudnánk mit kezdeni, célravezetőbb, ha azt adjuk meg, hogy hány darab részecske ( $n_0, n_1, n_2, \dots$ ) rendelkezik  $\varepsilon_0, \varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots$  energiával. Az  $n_i$  betöltési számok egy sorozata, definiálja a rendszer **állapotát**. **Termikus egyensúlyban** (azaz állandó hőmérsékleten,  $T = \text{konst.}$ ) **van egy legvalószínűbb állapot**, ami azt jelenti, hogy a rendszer szinte mindig ugyanebben az állapotban található. Ha teljesül az, hogy a rendszer energiája a részecskék energiájának összege, akkor  $n_i/n_j = e^{-\Delta\varepsilon/kT}$ , ahol  $\Delta\varepsilon = \varepsilon_i - \varepsilon_j$  és  $k$  a Boltzmann-állandó. Ez a Boltzmann-eloszlás egy lehetséges felírása, amiből azt olvashatjuk ki, hogy két állapot relatív betöltöttsége csak a  $kT$  egységekben mért energiakülönbségtől függ.

#### 3.1.2. Mire használható a Boltzmann-eloszlás? (példák)

*A barometrikus magasságformula* (hogyan változik a légkörben a nyomás?)

*A fémek termikus emissziója* (hőhatás következtében létrejövő elektron kilépés)

*Koncentrációs elemek* (az elektromos feszültség meghatározása: Nerst-egyenlet)

*Kémiai reakciók egyensúlya, sebessége* (Arrhenius-féle ábrázolás)

### 3.3. Szilárd anyagok

#### 3.3.1. A kristályos állapot

Legfontosabb tulajdonsága a **periodikus hosszú távú rendezettség**. Az **ideális kristály** (egykristály) azonos szerkezeti elemeknek a térben szabályosan ismétlődő végtelen sorozata. Geometriai tulajdonságait, illetve szimmetriáját a **térrács**sal jellemezzük, ami **elemi cellákból** építhető fel. Típusai: atom-, ion-, fémes és molekularács. A kristályos rend általában csak mikroszkopikus távolságokra terjed ki: mikrokristály. A kristályok **anizotropok**, vannak bennük kitüntetett irányok.

#### 3.3.2. Energiasávok

Amint az atomok a kristály felépülése érdekében egyre közelebb kerülnek egymáshoz, a **Pauli-elv érvényre jut**. Az azonos kvantumállapotok elkerülését a rendszer úgy valósítja meg, hogy a kölcsönhatásba kerülő **elektronok atomonként azonos energiaszintje  $N$  db közeli szintre „hasad fel”**. Mivel  $N$  igen nagy szám, ezért mindegyik atomi energiaszintből felhasadt közeli szintek sokasága egy-egy folytonos energiasávot képez: **vegyérték sáv**, **vezetési sáv**. A hol nincsenek megengedett energiaszintek azok a **tiltott sávok**.

#### 3.3.3. A tiltott sáv szélessége által meghatározott tulajdonságok; szigetelők, félvezetők, vezetők

Ha a vegyérték sáv teljesen betöltött és a vegyérték sáv és a vezetési sáv közötti tiltott sáv **„széles”** ( $\Delta\epsilon \gg kT$ , szobahőmérsékleten **néhány eV** nagyságú), akkor az anyag **szigetelő**. Ha ugyanez a tiltott sáv **„keskeny”** (szobahőmérsékleten **néhány tized eV** nagyságú), akkor az anyag szerkezeti vagy tiszta **félvezető**. Ha  $\Delta\epsilon = 0$ , ami **„részlegesen betöltött” vegyérték sáv** esetén lehetséges, akkor az anyag **vezető**.

A vezetési elektronok, mint  $n$ -típusú (negatív) töltéshordozók mellett a vegyérték sávban hátrahagyott elektronhiányok, a **lyukak**, mint  $p$ -típusú (pozitív) töltéshordozók szintén részt vesznek a vezetésben. A "sávmodell" alapján egyszerű képet alkotni az anyagok **optikai tulajdonságairól** is: a széles tiltott sávval rendelkező szigetelő anyagok **átlátszóak**.

#### 3.3.4. „Félvezető tulajdonság” létrehozása szennyezéssel

Kis mennyiségű idegen anyag (szennyező) bejuttatása egy teljesen betöltött vegyértéksávval rendelkező kristályrácsba olyan új elektronállapotok kialakulásához vezethet, amelyek az így létrehozott "új anyagnak" igen keskeny tiltott sávú félvezető jelleget kölcsönöznek. A **vezetési sávhoz közel** eső lazán kötött elektronállapot, ún. **donor nívó** esetén az elektron kis energia-felvétellel a vezetési sávba kerülhet, és részt vehet a vezetésben ( $n$ -típusú félvezető). A **vegyérték sávhoz közel** eső elektron-fogadó állapotot ún. **akceptor nívót** létrehozva azt a gazdarács vegyérték elektronjai kis energia-felvétellel betölthetik. Ilyenkor a visszamaradt lyuk vehet részt a vezetésben ( $p$ -típusú félvezető).

#### 3.3.5. A kristályszerkezet hibái

A rácshibák a kristályok természetes velejárói. Legfontosabb **ponthibák**: rácsluk (vakancia, Schottky-hiba), szennyezés, intersticium, összekapcsolt vakancia-intersticium képződmény (Frenkel-hiba). A Boltzmann-eloszlás segítségével megbecsülhető a Schottky-, illetve Frenkel-hibák száma:  $n_s \cong Ne^{-\epsilon_s / kT}$ ,  $n_F \cong (NN')^{1/2} e^{-\epsilon_F / 2kT}$ . A ponthibákból vonalak, élek, felületek (például szemcsehatárok) mentén újabb hibahelyek alakulhatnak ki.